

Лекция №10

Обратимся к вопросу о симметриях квантовой системы. Здесь имеются симметрии нового типа по сравнению с классическим случаем — свойства симметрии квантово-механической системы тождественных частиц.

Напомним сначала, классическую теорию. Если механическая система допускает группу симметрий G , то согласно теореме Нетер в гамильтоновом формализме, существует к интегралов движение $I_k(p, q)$ (k — размерность пространства параметров группы G):

$$\{I_k(p, q), H(p, q)\} = 0,$$

где $H(p, q)$ — гамильтониан системы.

Интегралы $I_k(p, q)$ генерируют инфинитезимальные преобразования

группы в наблюдаемых $\Rightarrow 2 =$
 системы: $(g(\omega) \circ f)(p, q) = f(p, q) +$
 $+ \sum_{i=1}^k \omega_i \delta_i f + \dots$

где $g(\omega) \in G$, ω_i - групповые параметры,
 то $\delta_i f(p, q) = \{I_i(p, q), f\}$.

Что понимается под симметрией в
 квантовой механике (аналог отсечки
 в классической механике)?

Пусть в гильбертовом пространстве
 \mathcal{H} системы \mathcal{H} задано
унитарное представление группы $Li G$:

$\forall g(\omega) \in G \mapsto \hat{S}(\omega)$ - унитарный
 линейный оператор в \mathcal{H} : $\hat{S}^\dagger(\omega) \hat{S}(\omega) = id_{\mathcal{H}}$
 Напомним, что действие унитарного
 оператора сохраняет скалярное произ-
 ведение в \mathcal{H} (а \Rightarrow и нормы всех
 векторов): $|\psi_\omega\rangle = \hat{S}(\omega)|\psi\rangle$, то

$$\underline{\forall |\psi\rangle \text{ и } |\varphi\rangle \Rightarrow \langle \psi_\omega | \varphi_\omega \rangle = \langle \psi | \varphi \rangle.}$$

$\forall g(\omega) \in G.$

С помощью этих путей получаем, $=3=$
 также, представленные группы G на
 линейных операторах, действующих в

$$\mathcal{H}: \hat{F} \mapsto \hat{F}_\omega = \hat{S}(\omega) \hat{F} \hat{S}(\omega)^{-1}$$

□ Будем называть G группой симметрии
квантовой системы, если её представле-
 ние в Гильбертовом пространстве \mathcal{H}
 коммутирует с оператором эволюции:

$$\hat{U}_\omega(t, t_0) = \hat{U}(t, t_0) \Leftrightarrow \hat{S}(\omega) \hat{U}(t, t_0) = \\ = \hat{U}(t, t_0) \hat{S}(\omega).$$

Для консервативных систем ($\frac{\partial \hat{H}}{\partial t} = 0$)
 оператор эволюции $\hat{U}(t, t_0) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t-t_0)\right)$

Введём также эрмитовы операторы

$\hat{Q}_k: 1 \leq k \leq K$ — операторы представленные

соответствующей алгебры Ли
 группы G :

$$\hat{Q}_j = \left. \frac{1}{i} \frac{\partial \hat{S}(\omega)}{\partial \omega_j} \right|_{\omega=0},$$

т. е. $\hat{S}(\omega) = \exp\left(i \sum_j \omega_j \hat{Q}_j\right)$.

Тогда группа симметрии G

Отвечает набор некоторого $n = 4 =$
 Эрмитовых операторов $\hat{Q}_j, j \in k$
 с неотрицательной областью определения, та-
 ким, что $[\hat{Q}_i, \hat{H}] = 0$.

То есть, \hat{Q}_i отвечают сохраняющимся
наблюдаемым (интегралам движения)
 квантовой системы:

$$\left\{ \begin{array}{l} i\hbar \frac{d\hat{Q}_j}{dt} = [\hat{Q}_j, \hat{H}] = 0 \\ \hat{Q}_j^\dagger = \hat{Q}_j. \end{array} \right.$$

Рассмотрим простейший и важный пример
симметрии относительно группы $G \cong SO(3)$ -
 - группы вращений пространства \mathbb{R}^3 .

Здесь элементами $g(\omega)$ являются ортого-
 нальные вещественные матрицы 3×3 :

$$g(\omega) = \exp(\omega_i M_i),$$

где $(M_i)_{ab} = -\epsilon_{iab}$.

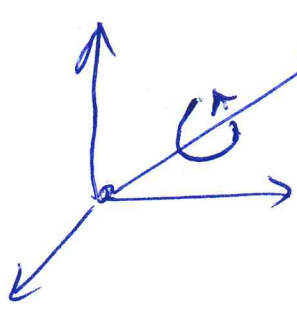
матричные индексы: $\begin{cases} a - \text{строки} \\ b - \text{столбцы} \end{cases}$

$$\vec{e}_a \xrightarrow{g(\omega)} \sum_{b=1}^3 \vec{e}_b g(\omega)_{ba}$$

$\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3$ - ортонор-
 миров. базис \mathbb{R}^3 .

$$M_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad M_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad M_3 = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = 5 =$$

Преобразование $g(\omega)$ представляет собой поворот вокруг вектора $\vec{n} = \frac{\vec{\omega}}{|\vec{\omega}|}$ на угол $|\vec{\omega}|$ против часовой стрелки:



$$\vec{n} = \frac{1}{|\vec{\omega}|} \begin{pmatrix} \omega_1 \\ \omega_2 \\ \omega_3 \end{pmatrix} \quad |\vec{\omega}| = \sqrt{\omega_1^2 + \omega_2^2 + \omega_3^2}$$

$$\forall \vec{x} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} \mapsto \vec{x}_\omega = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix}_\omega \quad \text{где}$$

$$x_i \omega = \exp(-\omega_a M_a)_{ij} x_j$$

Например, где $\vec{\omega} = (0, 0, \varphi)$:

$$\exp(-\omega_i M_i) = \exp(-\varphi M_3) = \begin{pmatrix} \cos \varphi & \sin \varphi & 0 \\ -\sin \varphi & \cos \varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Пусть инвариантно пространство

\mathcal{H} представляет собой $L_2(\mathbb{R}^3) \otimes \mathbb{C}^S$ —

— частица с внутренним моментом

(спином) $\mathcal{H} = \frac{S-1}{2}$.

На векторах $|\psi\rangle = \{ \psi_a(\vec{r}) \}_{1 \leq a \leq S} = \begin{pmatrix} \psi_1(\vec{r}) \\ \psi_2(\vec{r}) \\ \vdots \\ \psi_S(\vec{r}) \end{pmatrix}$

В пространстве $\mathcal{H} = L_2[\mathbb{R}^3] \otimes \mathbb{C}^S = \mathfrak{h} =$
 определено унитарное представление
 группы вращений $SO(3)$:

$|\psi\rangle \xrightarrow{g(\omega)} |\psi_\omega\rangle$, действующее по
 правилу:

$$\psi_a(\vec{r}) \mapsto (\psi_\omega)_a(\vec{r})$$

$$(\psi_\omega)_a(\underline{\underline{\vec{r}_\omega}}) = R_{ab}(\omega) \psi_b(\vec{r}).$$

Здесь $R_{ab}(\omega)$ - матричные элементы
 $S \times S$ матрицы, реализующей унитар-
 ное представление $SO(3)$ в \mathbb{C}^S :

$$R_{ab}(\omega) = \left(e^{i\omega_k \hat{\Sigma}_k} \right)_{ab}.$$

Таким образом:

$$\begin{aligned} (\psi_\omega)_a(x; \varphi) &= R_{ab}(\omega) \psi_b \left(e^{\omega_k M_k \vec{x}} \right) = \\ &= \left(\text{разложим в ряд по } \omega \text{ по порядку по} \right. \\ &\quad \left. \omega_k \right) = \\ &= \psi_a(\vec{x}) + i\omega_k \left(\hat{\Sigma}_k \right)_{ab} \psi_b(\vec{r}) + \\ &\quad + \sum_{j,m} \frac{\partial \psi_a}{\partial x_j} (\omega_k M_k)_{jm} x_m \end{aligned}$$

Если $(\psi)_a = \hat{S}(w)_{ab} \psi_b = = 7 =$

$$= \exp(i\omega_k \hat{Y}_k)_{ab} \psi_b,$$

то где Эрмитовых операторов \hat{Y}_k получаем выражение:

$$\hat{Y}_k = \hat{\Sigma}_k + \frac{1}{i} \sum_{j,m=1}^3 (M_k)_{jm} x_m \frac{\partial}{\partial x_j}$$

Вспомогательная функция M_k : $(M_k)_{jm} = -\epsilon_{kjm}$ и представляется, что в координатном представлении $\frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial x_j} = \frac{1}{\hbar} \hat{p}_j$ — оператор импульса,

получаем:

$$\hat{Y}_k = \text{id}_{L_2(\mathbb{R}^3)} \otimes \hat{\Sigma}_k + \frac{1}{\hbar} [\hat{q} \times \hat{p}] \otimes \mathbb{1}_S$$

Угловой момент в единицах \hbar .

Операторы \hat{Y}_k представляют сумму спина и орбитального углового момента — то есть, полный момент импульса частицы. Если гамильтониан коммутирует с операторами представления $\hat{S}(w)$, то полный ~~у~~ момент импульса — интеграл движения (сохраняется с течением времени).

Следствием инвариантности $\hat{H} = \delta =$
относительно действия \mathcal{G} является
структура собственных подпространств
оператора \hat{H} .

□ Подпространства векторов $|\psi\rangle$, являю-
щиеся собственными векторами \hat{H} с одним и
тем же собственным значением E , инвариант-
ны относительно действия группы \mathcal{G} :

$$\text{если } \hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle, \text{ то } \hat{H}|\psi_\omega\rangle \equiv \hat{H}S(\omega)|\psi\rangle =$$

$$E|\psi_\omega\rangle.$$

В частности, для генераторов \hat{Q}_k это
тоже верно: $[\hat{H}, \hat{Q}_k] = 0$, $|\psi\rangle \in W(E) \subset \mathcal{H}$,
то $\hat{Q}_k|\psi\rangle \in W(E)$, где $W(E)$ — линейная
оболочка собственных векторов \hat{H} с собствен-
ным значением E : $\hat{H}|_{W(E)} = E \text{id}_{W(E)}$

Ограничение \hat{H} на $W(E)$.

Менее тривиальное, но тоже не сложное
утверждение, состоит в следующем.

У] Если группа G симметрична $=g =$
квантовой системы мабелева, то
спектр \hat{H} обратно вырожден, т.е.

∫ E - с. значение \hat{H} , что $\dim W(E) > 1$.

$W(E)$ - линейная оболочка собств. векторов
 \hat{H} с собств. значением E : $\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle \forall |\psi\rangle \in W(E)$.

Доказательство:

Если G - мабелева группа, то ее алгебра
ли по крайней мере 3-мерна и среди
барисовых элементов этой алгебры ли обяза-
тельно найдутся 2, скобка ли которых
не равна нулю. Обозначим соответствен-

ные эрмитовы операторы, соответствующие
из представления \hat{S} , символами \hat{A} и \hat{B} :

$$[\hat{A}, \hat{H}] = [\hat{B}, \hat{H}] = 0, \text{ но}$$

$$[\hat{A}, \hat{B}] \neq 0$$

$$\hat{A}^\dagger = \hat{A}, \hat{B}^\dagger = \hat{B}.$$

Поскольку $[\hat{A}, \hat{B}] \neq 0$, то операторы \hat{A} и
 \hat{B} не могут обладать общим барисовым
системой собственных векторов.

Зам. Некоторое собств. вектора $= \lambda =$
 \hat{A} и \hat{B} могут быть разными, но
базиса они образуют не будут.

Теперь докажем лемму Веронженского
спектра \hat{H} ~~не~~ строится леммой об
противном: пусть спектр не вырожден:

$$\hat{H} |\psi_E\rangle = E |\psi_E\rangle \text{ и } \dim W(E) = 1.$$

В силу самосопряженности \hat{H} , набор
из собственных векторов $|\psi_E\rangle$ — базис
в гильбертовом пространстве \mathcal{H} .

С другой стороны, в силу инвариантности
собственных подпространств $W(E)$ от \hat{A} :

$$\hat{A} |\psi_E\rangle \in W(E) \Rightarrow \hat{A} |\psi_E\rangle = \alpha |\psi_E\rangle \text{ в}$$

силу одномерности $W(E)$. Аналогично

из инвариантности $W(E)$ оператора \hat{B} :

$$\hat{B} |\psi_E\rangle = \beta |\psi_E\rangle.$$

Таким образом, $\forall |\psi_E\rangle$ — общий
собственный вектор \hat{A} и \hat{B} и набор этих
общих собств. векторов — базис в \mathcal{H} .

Дрота борется.

Зам. Иммустирацией этого $= 11 =$
универсальная является зарядка 0
спектре атома водорода. Этот
спектр вырожден, поскольку группа сим-
метрии $SO(3)$ - кеабидева.

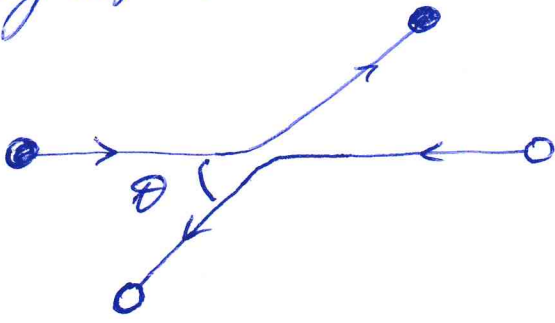
Рассмотрим теперь симметрии другого
типа, связанные с системами из несколь-
ких распространенных частиц.

С физической точки зрения взаимодей-
ствием называются системы, которые нельзя
разделить никакими физическими экс-
периментами.

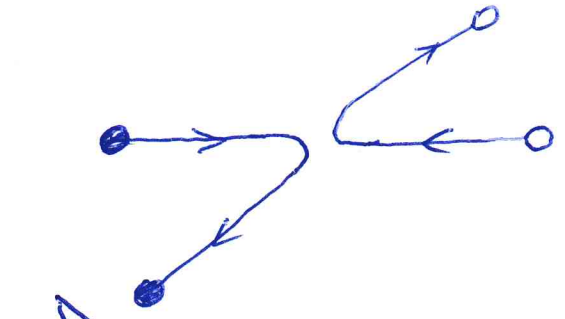
Как следствие, результаты экспериментов
системами различных и распространенных
частей будут отличаться.

Пусть, например, мы наблюдаем
рассеяние 2х разных частиц \bullet_1 и \circ_2
и наш детектор частиц срабатывает,
если в него попадает частица \circ и
не срабатывает, если попадает
частица \bullet . Допустим, нас интере-
сует вероятность рассеяния частицы \circ

В какой-то заданной направ- = 12 =
 лени. В эксперименте возможны
 2 ситуации:

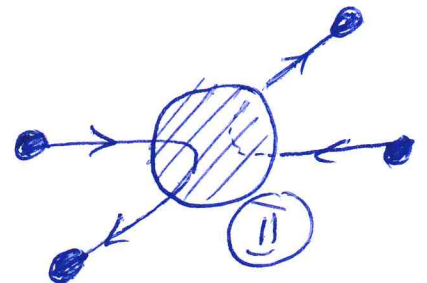
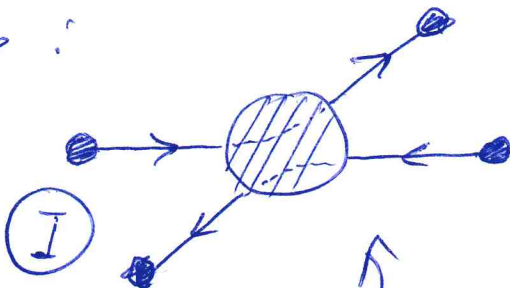


Детектор. Здесь он
 сработает.



Здесь детек-
 тор не сработает.

Если частица \circ топсредствитна с \bullet
 то 2 этих канала невозможно
 отличить:



В классике эти процессы различимы
 даже для орбитальных частиц, поскольку
 есть принципиальная возможность
 детально измерить за камерой частицы
 в любой точке ее траектории.

В квантовой механике траекторий нет
 и не существует способов ~~точно~~ опреде-
 лить реализуется ли вариант (I)

или вариант ~~II~~ (II) при расщеплении $=13=$
 частицы. Это означает, что амплитуды
 вероятности этих процессов могут
 отличаться только фазовым множителем
 или $e^{i\alpha}$. Но (I) и (II) отличаются только
перестановкой расщепленных частей.

\Rightarrow если еще раз сделать перестановку, то
 с одной стороны, мы вернемся к началу
 тому варианту, а с другой стороны, получим
 еще один фазовый множитель:

$$e^{2i\alpha} = 1 \Rightarrow e^{i\alpha} = \pm 1.$$

Таким образом определены тождественных
 частей.

\square Пусть любой вектор состояния
 системы n частиц $|\xi_1, \dots, \xi_n\rangle$,
 (где ξ_i - полный набор квантовых чисел,
 определяющих состояние частицы) изме-
 няется на $e^{i\alpha}$ или $-e^{i\alpha}$ при трансмутации \forall пар
 ξ_i и ξ_j , т.е. $|\xi_1, \dots, \xi_n\rangle$ - полностью
 симметрическая или антисимметрическая
 функции наборов ξ_i .

Тогда эти частицы будем называть топерестивными частицами, под которыми понимаем статистике Бозе-Эйнштейна (если фазовый множитель $+1$) или статистике Ферми-Дирака (если фазовый множитель -1). Коротко говорим о частицах - бозонах или о частицах - фермионах.

Заметим, что это определение имеет смысл, если в V содержится мн моделей "выделить" отдельные частицы, т.е. Шрёдингерово пространство состояний $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1^{\otimes n}$, где \mathcal{H}_1 - пространство состояний одной частицы. Такая ситуация имеет место для не взаимодействующих или слабо взаимодействующих частиц.

Подчеркнем, что симметрия вектора состояния с множителями ± 1 требуется при перестановках всего набора переменных ξ_i и ξ_j относительна к 2 частицам. Например, $\xi = (E, l_1, l_3 | \sigma_z)$ - энергия углового момента и его проекция, σ_z - компоненты проекции спина \uparrow .

Связь спина со статистикой. =15=

В квантовой теории поля показывается, что статистика, которой подчиняется частица, определяется значением её спина: все частицы с целым спином ($s \in 0, 1, 2, \dots$) являются бозонами, а частицы с полуцелым спином ($s \in \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \dots$) являются фермионами.

Примеры фермионов: электрон, протон, нейтрон

Примеры бозонов: фотон, мезоны (переносчики ядерных взаимодействий).

Следствием полной антисимметрии вектора состояния фермионов является принцип запрета Паули (он его формулировал для электронов): в любой системе n фермионов ($n \geq 2$) никакие 2 из них не могут находиться в одинаковых одночастичных состояниях (т.е. $\xi_i = \xi_j$ при $i \neq j$).

Далее подробно рассмотрим построение векторов состояния для фермионов. Одними из примеров

Будем обозначение строим = 16 =
 периодическая таблица химических
 элементов Д.И. Менделеева.

Обозначим вектор из пространства

$$\mathcal{H} \otimes \mathcal{H} \otimes \dots \otimes \mathcal{H}$$

n штук одномерных пространств
 символом:

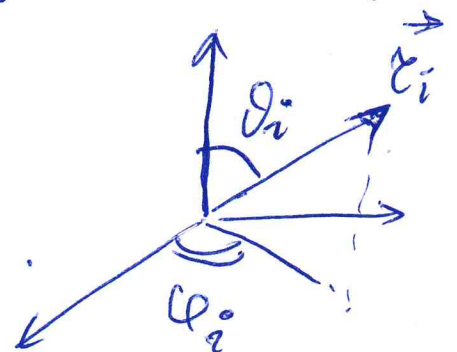
$$\psi_1 \otimes \psi_2 \otimes \dots \otimes \psi_n,$$

который будем сокращать до $\psi_1 \psi_2 \dots \psi_n$,
 опуская знак \otimes . Заметь $\psi_i(\xi_j)$ будет
 означать, что на j -м месте в $\mathcal{H} \otimes \dots \otimes \mathcal{H}$
 имеет волновая функция (вектор состояния),
 определенная набором ξ_j . Например,
 для электрона в кулоновском потенциале
 $\mathcal{H} = L_2[\mathbb{R}^3] \otimes \mathbb{C}^2$ и $\xi = (n, l, m | \sigma)$ —
 набор квантовых чисел, отвечающих
 полному набору операторов \hat{H}, \hat{L}^2, L_3 и S_3

Тогда
$$\psi_i(\xi_j) = \phi_{n_j}(r_i) Y_{l_j}^{m_j}(\theta_i, \varphi_i) \otimes \chi_j$$

$$\chi_j = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \text{ при } \sigma_j = \frac{1}{2}$$

$$\chi_j = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \text{ при } \sigma_j = -\frac{1}{2}$$



Если все протранзитивные =17=
 возможные фермионы попарно различны,

т.е. для $\forall \xi_i = (n_i, l_i, m_i | G_i)$ и

$\xi_j = (n_j, l_j, m_j | G_j)$

не совпадают хотя бы одна пара n_i и n_j , l_i и l_j или m_i и m_j , то спины электронов могут быть ориентированы произвольно и мы имеем всего 2^n различных векторов состояния (по числу G_i)

$$|\xi_1 \dots \xi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} \det \begin{pmatrix} \psi_1(\xi_1) & \psi_2(\xi_1) & \dots & \psi_n(\xi_1) \\ \psi_1(\xi_2) & \psi_2(\xi_2) & \dots & \psi_n(\xi_2) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_1(\xi_n) & \psi_2(\xi_n) & \dots & \psi_n(\xi_n) \end{pmatrix}$$

~~Формула~~

Однако, если есть совпадающие протранзитивные части, то количество возможных состояний и их структура уже не определяется так просто.

Для дальнейшего нам потребуется некоторые факты из теории групп перестановок S_n . Сделаем небольшие отступления и кратко напомним эти факты.

Итак, S_n - группа перестановок $= 18 =$
 порядка n (группа биекций множества
 упорядоченных номеров $1, 2, \dots, n$
 и различных элементов в себя) содержит,
 как известно, $n!$ элементов.

Рассмотрим групповую алгебру $C[S_n]$
 ($n!$ -мерное пространство линейных ком-
 бинарий $\sum_{g \in S_n} \alpha_i g_i$, $\alpha_i \in C$ с правилом
 умножения индуцированным групповым
 законом комбиники перестановок).

На пространстве $C[S_n]$ определено
 левое регулярное представление группы
 S_n , где действие $\forall a \in S_n$ на $\forall v \in C[S_n]$
 определяется левым умножением на a :

$$v = \sum_i v_i g_i$$

$$a \triangleright v = \sum_i v_i (a \cdot g_i).$$

Это приводимое представление и любой
 неприводимый модуль в $C[S_n]$ входит
 в разложение в прямую сумму неприво-
 димых модулей с кратностью, равной
 размерности данного модуля.

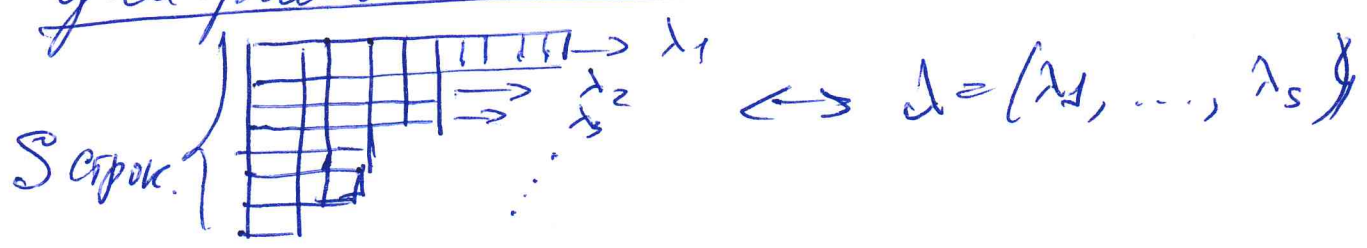
Неприводимые модули параметризируются $= 19 =$
 зрительное разбиением числа n в
 сумму положительных слагаемых:

$$\lambda \vdash n : \lambda = (\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_s)$$

$$\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_s > 0$$

$$\lambda_1 + \lambda_2 + \dots + \lambda_s = n$$

В разбиении взаимно-однозначно соответ-
 ствует диаграмма Юнга:



$$\text{Таким образом: } \mathbb{C}[S_n] = \bigoplus_{\lambda \vdash n} V_\lambda \cdot d_\lambda$$

$$d_\lambda = \dim V_\lambda$$

Разложение в прямую сумму неприводи-
 мых ~~модулей~~ модулей отвечает разложению
 единичного элемента e в сумму
примитивных идемпотентов $\gamma_{\lambda a}$:

$$e = \sum_{\lambda \vdash n} \sum_{a=1}^{d_\lambda} \gamma_{\lambda a}$$

Это разложение в $\mathbb{C}[S_n]$. $\gamma_{\lambda a}$ — попарно-
 мы эти элементов S_n — ортонормированные
проекторы:

$$\sum_{\lambda \vdash n} \mu_{\lambda} = \sum_{\lambda \vdash n} \mu_{\lambda} = 0 \quad \text{for } n > 1$$

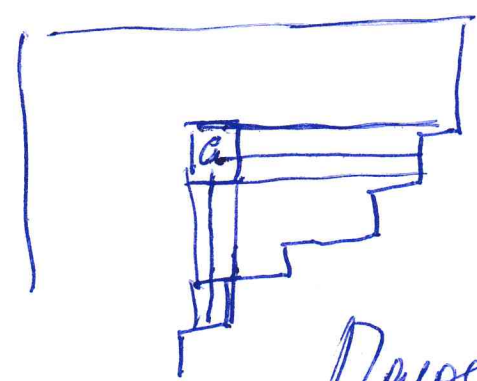
λ_a — это множество стандартных таблиц, отвечающих диаграмме λ .

$d_{\lambda} = \dim \lambda =$ количество таблиц, которые можно получить для данной диагр. λ .

$$d_{\lambda} = \frac{n!}{\prod_{a \in \lambda} l_a!}$$

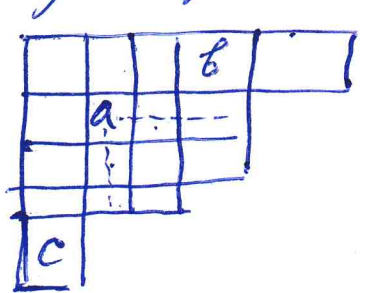
Формула "крюков"

l_a — длина "крюка" клетки a .

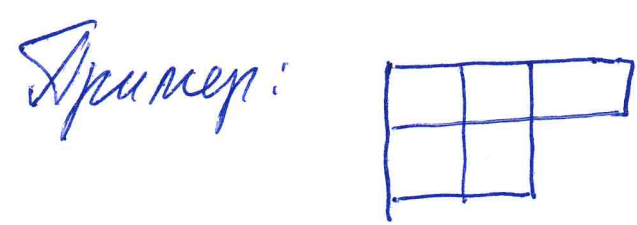


$l_a =$ число клеток в угловом крючке с углом в клетке a .

Плюс продвигается горизонтально вправо и вертикально вниз из "а" до границы диаграммы.



Пример: $l_a = 5$
 $l_b = 4$
 $l_c = 1$.



$n = 5$
 $\lambda = (3, 2)$
 $d_{\lambda} = \frac{5!}{1 \cdot 3 \cdot 4 \cdot 2 \cdot 1} = 5$.

Всего имеется 5 стандартных $= 21 =$
таблиц формы $\lambda = (3, 2)$. Их можно
выписать:

$$\begin{array}{|c|c|c|} \hline 1 & 2 & 3 \\ \hline 4 & 5 & \\ \hline \end{array}, \quad \begin{array}{|c|c|c|} \hline 1 & 2 & 4 \\ \hline 3 & 5 & \\ \hline \end{array}, \quad \begin{array}{|c|c|c|} \hline 1 & 2 & 5 \\ \hline 3 & 4 & \\ \hline \end{array},$$

$$\begin{array}{|c|c|c|} \hline 1 & 3 & 4 \\ \hline 2 & 5 & \\ \hline \end{array} \quad \text{и} \quad \begin{array}{|c|c|c|} \hline 1 & 3 & 5 \\ \hline 2 & 4 & \\ \hline \end{array}.$$

По заданной таблице λ_a строим
2 ~~мат~~ полиномиала:

$$P^{(a)} = P_{\lambda_1} \cdot P_{\lambda_2} \cdots P_{\lambda_5}$$

P_{λ_i} — полный симметризатор в
подгруппе S_{λ_i} перестановок
символов, попавших в строку λ_i
таблицы λ_a

$$Q^{(a)} = Q_{\tau_1} \cdots Q_{\tau_m} \quad \tau_1 \cdots \tau_m - \text{столбцы}$$

диаграммы λ .

Q_{τ_i} — полный антисимметризатор в
подгруппе перестановок символов,
попавших в столбец τ_i таблицы
 λ_a .

Тогда
$$Y_{\lambda_a} = \frac{1}{N} Q^{(a)} \cdot P^{(a)}$$

$$\uparrow$$
 норм. множитель.

Примеры:

= 22 =

$$n=2: S_2 = \{e, (12)\}$$

$$\text{транспонирование: } \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 1 \end{pmatrix}$$

Есть 2 разбиения $n=2$: $\lambda = (2) = \square \square$

$$\lambda = (1, 1) = \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \end{array}$$

$$Y_{\square \square} = \frac{1}{2} (e + (12))$$

$$Y_{\begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \end{array}} = \frac{1}{2} (e - (12))$$

↑ по первой стандартной
таблице.

$$n=3 \quad S_3 = \{e, (12), (13), (23), (123), (132)\}$$

$$(123) = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 3 & 1 \end{pmatrix} \text{ и } (132) = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 3 & 1 & 2 \end{pmatrix} - \text{циклы}$$

$$\begin{array}{l} (132) = (12)(13) \\ (123) = (12)(23) \end{array} \left. \begin{array}{l} \text{разложение в} \\ \text{транспозиции} \\ \text{(неупорядоченное)} \end{array} \right\}$$

Таблицы разбиения числа $n=3$

$$3=3 \rightarrow \square \square \square \quad \lambda = (3) \quad d_{\lambda} = 1 \rightarrow \square \square \square$$

$$3=2+1 \rightarrow \begin{array}{|c|} \hline \square \square \\ \hline \square \\ \hline \end{array} \quad \lambda = (2, 1) \quad d_{\lambda} = 2 \rightarrow \begin{array}{|c|} \hline \square \square \\ \hline \square \\ \hline \end{array} \text{ и } \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \square \square \\ \hline \end{array}$$

$$3=1+1+1 \rightarrow \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \end{array} \quad \lambda = (1, 1, 1) \quad d_{\lambda} = 1 \rightarrow \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \end{array}$$

Разложение ермитта:

$= 23 =$

$$Y_{\begin{array}{|c|} \hline 1 \\ \hline 2 \\ \hline 3 \\ \hline \end{array}} = \frac{1}{6} (e - (12) - (13) - (23) + (123) + (132))$$

$$Y_{\begin{array}{|c|c|} \hline 1 & 2 \\ \hline 3 & \\ \hline \end{array}} = \frac{1}{3} \underbrace{(e - (13))}_Q \underbrace{(e + (12))}_P = \frac{1}{3} (e - (13) + (12) - (13)(12))$$

$$Y_{\begin{array}{|c|c|} \hline 1 & 3 \\ \hline 2 & \\ \hline \end{array}} = \frac{1}{3} \underbrace{(e - (12))}_Q \underbrace{(e + (13))}_P = \frac{1}{3} (e - (12) + (13) - (12)(13))$$

$$Y_{\begin{array}{|c|c|c|} \hline 1 & 2 & 3 \\ \hline \end{array}} = \frac{1}{6} (e + (12) + (13) + (123) + (132) + (23))$$

Видно, что $e = \begin{array}{|c|} \hline 1 \\ \hline 2 \\ \hline 3 \\ \hline \end{array} + \begin{array}{|c|c|} \hline 1 & 2 \\ \hline 3 & \\ \hline \end{array} + \begin{array}{|c|c|} \hline 1 & 3 \\ \hline 2 & \\ \hline \end{array} + \begin{array}{|c|c|c|} \hline 1 & 2 & 3 \\ \hline \end{array}.$

Каждый идеал порождает неприводимый модуль (минимальный левый идеал):

$$V_{\lambda_a} = \mathbb{C}[S_n] \cdot Y_{\lambda_a}$$

Построим теперь вектора состояния n электронов в центрально-симм. поле (например в водородоподобном атоме или в поле изотропного гармонического осциллятора и т.п.)

$$\mathcal{H} = L_2(\mathbb{R}^{3n}) \otimes (\mathbb{C}^2)^{\otimes n}$$

Вектора состояния $\psi \in \mathcal{H}$:

$\psi(\xi_1, \dots, \xi_n)$ — волновая функция относительно перестановки ξ_i

$\xi_i = (\underbrace{n_i, l_i, m_i}_{\text{пространственные квантовые числа}} \mid \underbrace{0_i}_{\text{спин}})$ — проекция спина на ось z i -й частицы.

Будем представлять ψ в виде линейных комбинаций векторов вида:

$$\underbrace{\psi_1(\vec{\xi}_1) \dots \psi_n(\vec{\xi}_n)}_{\text{пространственная часть}} \otimes \underbrace{\chi(\sigma_1, \dots, \sigma_n)}_{\text{спиновая часть}}$$

Группа перестановок S_n действует на этих векторах диагонально: очевидно переставляет $\vec{\xi}_i$ и σ_i . Например, перестановка $\eta_1 \leftrightarrow \eta_2$ приводит к резу:

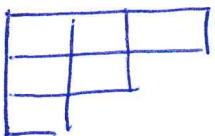
$$\underbrace{\psi_1(\vec{r}_1) \psi_2(\vec{r}_2) \psi_3(\vec{r}_3) \dots \psi_n(\vec{r}_n)} \otimes \chi(\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3 \dots \sigma_n) \quad \overset{=2^5=}{\downarrow}$$

$$\downarrow (12) \quad \downarrow$$

$$\underbrace{\psi_1(\vec{r}_2) \psi_2(\vec{r}_1) \psi_3(\vec{r}_3) \dots \psi_n(\vec{r}_n)} \otimes \chi(\sigma_2, \sigma_1, \sigma_3 \dots \sigma_n)$$

Если все ψ_i различны, то в пространственной части получаем $n!$ различных функций. Это регулярное представление, разлагается в прямую сумму по всем V_λ , $\lambda \vdash n$.

Если же некоторые ψ_i совпадают, то не все V_λ реализуется:

$\lambda \rightarrow$  — проекторы V_λ содержат антисимметризацию по столбцам в одной столбце \Rightarrow номера орбитальных ψ не должны повторяться в одной столбце. (меньшая кратность вхождений V_λ в прямую сумму). Если имеется всего k разных типов пространственных волновых функций ($k < n$), то V_λ с диаграммой λ меньшей больше k строк

не возникнут вообще (нулевая кратность) = 2b =

Итак, пусть есть k групп различных одночленных пространственных вейснеровских функций:

$$\underbrace{\psi_1 \psi_1 \dots \psi_1}_{z_1 \text{ штук}} \geq \underbrace{\psi_2 \psi_2 \dots \psi_2}_{z_2 \text{ штук}} \geq \dots \geq \underbrace{\psi_k \psi_k \dots \psi_k}_{z_k \text{ штук}}$$

$$z_1 + z_2 + \dots + z_k = n$$

↑ всегда можно так упорядочить.

Соответствующий модуль в пространственной решетке обозначим $V(z_1, z_2, \dots, z_k)$.

$$\text{Очевидно, } \dim V(z_1, z_2, \dots, z_k) = \frac{n!}{z_1! z_2! \dots z_k!}$$

Модуль $V(z_1, \dots, z_k)$ разлагается в прямую сумму по V_λ , у которых тако строк $|\lambda| \leq k$.

$$V(z_1, \dots, z_k) = \bigoplus_{\substack{\lambda \vdash n \\ |\lambda| \leq k}} V_\lambda d_\lambda'$$

кратность d'_x равна тому $= 27 =$
количество таблиц Юнга:

количество таблиц: замкнем g_i -
 аграмму числами $\underbrace{1 \ 1 \dots 1}_{\tau_1} \quad \underbrace{2 \ 2 \dots 2}_{\tau_2} \dots \underbrace{k \ k \dots k}_{\tau_k}$

так, что в строках числа не убывают,
 а в столбцах - строго возрастают
 при движении, соответственно, слева
 направо и сверху вниз.

Пример: $n=5$, $\psi_1 \psi_1 \psi_2 \psi_2 \psi_3$
 $\tau_1=2 \quad \tau_2=2 \quad \tau_3=1$

$$V(2,2,1) : \dim V_{(2,2,1)} = \frac{5!}{2!2!} = \underline{30}.$$

Разложения на неприводимые:

$$\mu = (\tau_1, \tau_2, \tau_3) \rightarrow \begin{array}{|c|c|} \hline \square & \square \\ \hline \square & \square \\ \hline \square & \square \\ \hline \end{array} \quad |\mu| = 3$$

В разложении будет λ , полученный
 из μ переводом части клеток из ниж-
 них строк в верхние: $|\lambda| \leq |\mu| = 3$.

Уточн:

= 28 =

$$V_{(2,2,1)} = V_{\begin{array}{|c|c|} \hline \square & \square \\ \hline \square & \square \\ \hline \square & \square \\ \hline \end{array}} \cdot d'_{\begin{array}{|c|c|} \hline \square & \square \\ \hline \square & \square \\ \hline \square & \square \\ \hline \end{array}} \oplus V_{\begin{array}{|c|c|} \hline \square & \square \\ \hline \square & \square \\ \hline \square & \square \\ \hline \end{array}} d'_{\begin{array}{|c|c|} \hline \square & \square \\ \hline \square & \square \\ \hline \square & \square \\ \hline \end{array}} \oplus V_{\begin{array}{|c|c|} \hline \square & \square \\ \hline \square & \square \\ \hline \square & \square \\ \hline \end{array}} \cdot d'_{\begin{array}{|c|c|} \hline \square & \square \\ \hline \square & \square \\ \hline \square & \square \\ \hline \end{array}} \\ \oplus V_{\begin{array}{|c|c|c|} \hline \square & \square & \square \\ \hline \square & \square & \square \\ \hline \square & \square & \square \\ \hline \end{array}} \cdot d'_{\begin{array}{|c|c|c|} \hline \square & \square & \square \\ \hline \square & \square & \square \\ \hline \square & \square & \square \\ \hline \end{array}} \oplus V_{\begin{array}{|c|c|c|} \hline \square & \square & \square \\ \hline \square & \square & \square \\ \hline \square & \square & \square \\ \hline \end{array}} \cdot d'_{\begin{array}{|c|c|c|} \hline \square & \square & \square \\ \hline \square & \square & \square \\ \hline \square & \square & \square \\ \hline \end{array}}$$

Считаем кратности d' .

$d'_{\begin{array}{|c|c|} \hline \square & \square \\ \hline \square & \square \\ \hline \square & \square \\ \hline \end{array}} = 1$, т.к. есть 1 невыступающая таблица, заполненная числами 1 1 2 2 3:

1	1
2	2
3	

$$d'_{\begin{array}{|c|c|c|} \hline \square & \square & \square \\ \hline \square & \square & \square \\ \hline \square & \square & \square \\ \hline \end{array}} = 1 \leftrightarrow \begin{array}{|c|c|c|} \hline 1 & 1 & 2 \\ \hline 2 & & \\ \hline 3 & & \\ \hline \end{array}$$

$$d'_{\begin{array}{|c|c|c|} \hline \square & \square & \square \\ \hline \square & \square & \square \\ \hline \square & \square & \square \\ \hline \end{array}} = 2 \leftrightarrow \begin{array}{|c|c|c|} \hline 1 & 1 & 2 \\ \hline 2 & 3 & \\ \hline & & \\ \hline \end{array} \text{ и } \begin{array}{|c|c|c|} \hline 1 & 1 & 3 \\ \hline 2 & 2 & \\ \hline & & \\ \hline \end{array}$$

Аналогично:

$$d'_{\begin{array}{|c|c|c|c|} \hline \square & \square & \square & \square \\ \hline \square & \square & \square & \square \\ \hline \square & \square & \square & \square \\ \hline \end{array}} = 2 \text{ и } d'_{\begin{array}{|c|c|c|c|} \hline \square & \square & \square & \square \\ \hline \square & \square & \square & \square \\ \hline \square & \square & \square & \square \\ \hline \end{array}} = 1.$$

По формуле крюков размерности

$$\text{дюржей } V_\lambda: \dim V_{\begin{array}{|c|c|} \hline \square & \square \\ \hline \square & \square \\ \hline \square & \square \\ \hline \end{array}} = \dim V_{\begin{array}{|c|c|c|} \hline \square & \square & \square \\ \hline \square & \square & \square \\ \hline \square & \square & \square \\ \hline \end{array}} = 5$$

$$\dim V_{\begin{array}{|c|c|c|} \hline \square & \square & \square \\ \hline \square & \square & \square \\ \hline \square & \square & \square \\ \hline \end{array}} = 4 \quad \dim V_{\begin{array}{|c|c|c|c|} \hline \square & \square & \square & \square \\ \hline \square & \square & \square & \square \\ \hline \square & \square & \square & \square \\ \hline \end{array}} = 6$$

антисимметризации: $\begin{matrix} & a & \\ b & & \end{matrix} \rightarrow = 30 =$

$$\rightarrow \sigma_a \otimes \sigma_b - \sigma_b \otimes \sigma_a \sim \uparrow \otimes \downarrow - \downarrow \otimes \uparrow \text{ или } \downarrow \otimes \uparrow - \uparrow \otimes \downarrow$$

зависимости от σ_a и $\sigma_b = -\sigma_a$.

А такая антисимм. комбинация образует спин 0 (сферическая мода).

по номерам $2j$ строки, всплывающим за векторно строку, сохраняется

полная симметрия \Rightarrow есть старший вектор $\uparrow \otimes \uparrow \otimes \dots \otimes \uparrow \rightarrow \hat{S}_3 = \frac{\lambda_1 - \lambda_2}{2}$.

$$\text{Далее } \hat{S}_- = S_- \otimes 1 \otimes \dots \otimes 1 + 1 \otimes S_- \otimes 1 \otimes \dots \otimes 1 + \dots + 1 \otimes 1 \otimes \dots \otimes S_-$$

порядка все симметричное пространство.

Ка каждой шаге S_- опускает одну стрелку $\uparrow \rightarrow \downarrow \Rightarrow$ всего $(\lambda_1 - \lambda_2)$

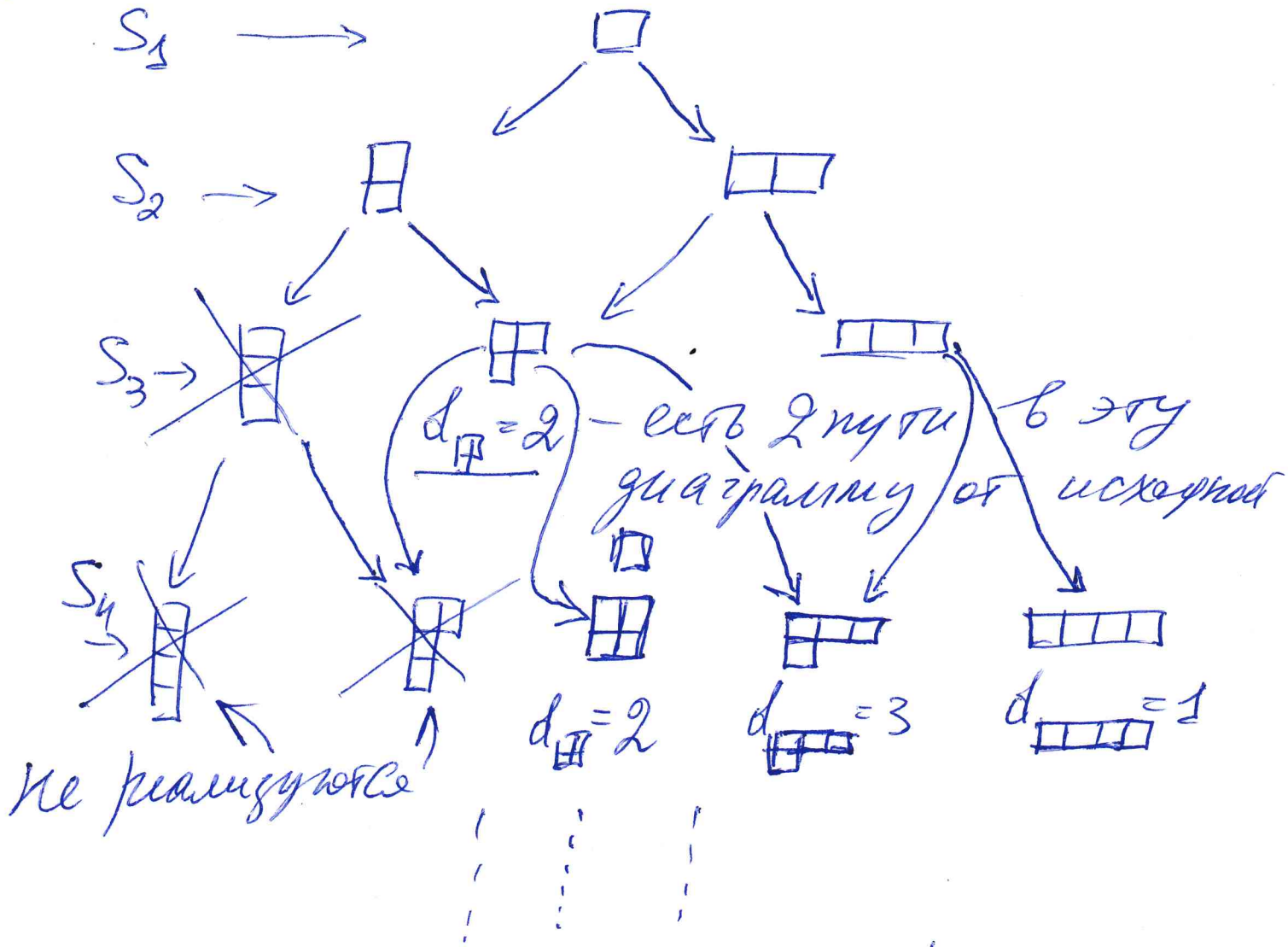
шаг приведет нас к $\downarrow \otimes \downarrow \otimes \dots \otimes \downarrow$

\Rightarrow dim моды: $\lambda_1 - \lambda_2 + 1$.

Кривизна $K(\lambda_1, \lambda_2)$:

$$d(\lambda_1, \lambda_2) = (\lambda_1 - \lambda_2 + 1) \frac{(\lambda_1 + \lambda_2)!}{\lambda_2! (\lambda_1 + 1)!}$$

Эту кратность можно где $= 3d =$
 наименьших λ_1 и λ_2 считать из
 диаграммы Брайем, с учетом
 исключенные модули, отвечающих
 диаграммам λ с $|\lambda| > 2$:



Таким образом, например, 4 стика

$\uparrow \downarrow \uparrow \uparrow$

$2^4 = 16$ мерное пространство.

разлагается в:

$$2 \cdot V_{\begin{array}{|c|c|} \hline \square & \square \\ \hline \end{array}} + 3 \cdot V_{\begin{array}{|c|c|c|} \hline \square & \square & \square \\ \hline \end{array}} + 1 \cdot V_{\begin{array}{|c|c|c|c|} \hline \square & \square & \square & \square \\ \hline \end{array}} = 2 + 9 + 5 = 16$$

стик 0, 1 мерный модуль

Дальше мы используем = 32 =
 утверждение из теории представле-
 ний группы S_n :

□ В разложении в непрямую сумму
 неприводимых модулей произведение

$V_\lambda \otimes V_\mu$ полностью антисимметриче-
 ское (знакопеременное) представление
 встречается тогда и только тогда,
 когда $\lambda = \mu^T$. Кратность ^{входящий} λ знакопере-
 менного ~~модуля~~ модуля равна 1.

□ В пространственной части системы
 n фермионов не может быть больше
 $2x$ совпадающих ортогональных функ-
 ций какого-то сорта: $\gamma_i \leq 2$.

Действительно, если есть 3 совпа-
 дающие функции:

$$\begin{array}{ccccccc} \psi_1 & \psi_1 & \psi_1 & \psi_2 & \psi_2 & \dots & , \text{ то} \\ \underbrace{}_{\gamma_1} & & & & & & \end{array}$$

такой ситуации отвечает μ с 3 столб-
 цами:

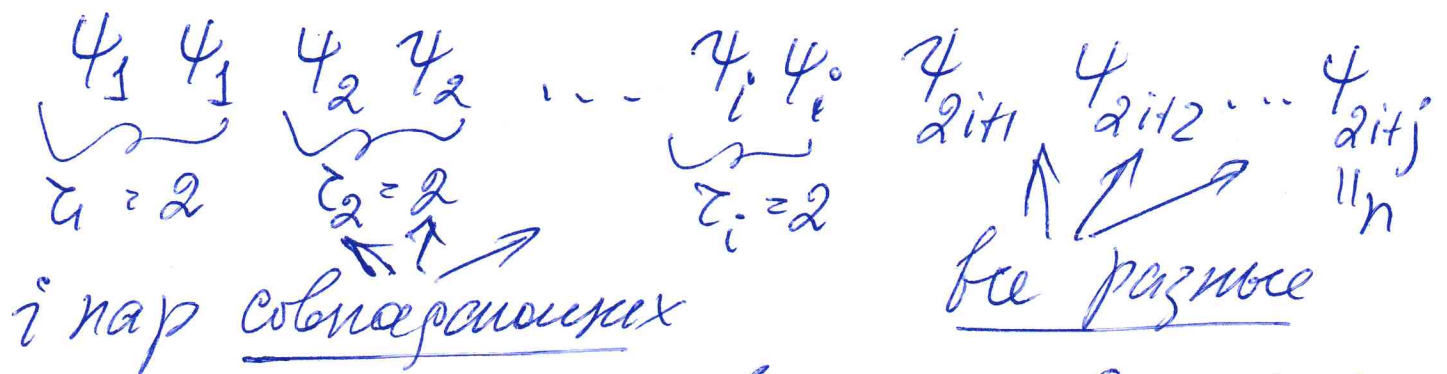
 \Rightarrow все λ тоже будут

иметь ≥ 3 столбца (1 пара - $= 33 =$ ются из μ переводов клеток из нижних строк в верхние).

Чтобы написать с такой пространными V_1 полностью антисимметрический морфизм, его надо уложить на V_{λ^T} в сшивочной части.

Но λ^T будет иметь ≥ 3 строки, если λ имеет ≥ 3 столбца. А в сшивочной части таких морфизмов нет (напомним, что в сшивочной части только 2×2 строгие диаграммы).

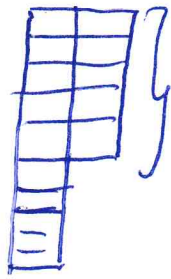
Итак, пусть есть такой набор параметризованных одночастичных функций:



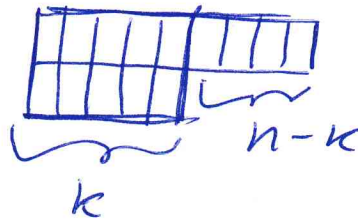
Возможные произведения, содержащие полностью антисимметрический вектор (одномерный законере-

мелкий модуль):

=34=



$$k \geq i \quad \otimes$$



простр. часть

спиновая часть.

Итак, возможны состояния с полным суммарным спином

$$S = \frac{n-2i}{2} = \frac{j}{2}, \frac{j}{2} - 1, \dots, \begin{cases} \frac{1}{2}, & \text{если } n - \text{нечётно} \\ 0, & \text{если } n - \text{чётно} \end{cases}$$

Итак, общие правила построения состояний с i парами одинаковых пространств. функции таковы:

①. Для каждой пары a и b электронов с одинаковой пространственной частью ψ составляем

$$\psi_{ab} = \psi(r_a) \psi(r_b) \frac{1}{\sqrt{2}} (\uparrow_a \downarrow_b - \downarrow_a \uparrow_b)$$

ψ антисимметрично при перестановке $a \leftrightarrow b$

Затем перемножим ψ_{ab} для всех пар и антисимметризуем по всем

разбиением $2i$ электронов на $= 25 =$
множество с $2i$ парами.

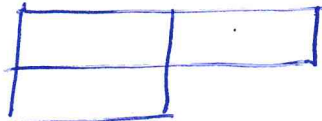
(2°) Оставимся свободными (неспаренными) $n-2i$ электронов с разными пространственными функциями антисимметризуем по схеме:

$$\underbrace{\lambda^T} \otimes \underbrace{\lambda}$$

простр. спиновая часть

где $\lambda \vdash (n-2i)$ и $|\lambda| \leq 2$ (не более $2 \times$ строк).

Каждой такой диаграмме $n-2i-k$

$$\lambda_1 = n-2i-k \quad \lambda_2 = k$$


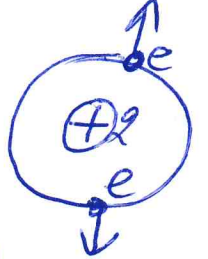
отвечает наименьший спин $S = \frac{n}{2} - i - k$.

(3°) Полученное на 1х двух шагах функции $\varphi_{a_1 \dots a_{2i}}$ соответствующий $2i$ пар и $\varphi_{a_{2i+1} \dots a_n}$ — соответствующий $n-2i$ не спаренных электронов перемножаем и антисимметризуем $\frac{n!}{(2i)!(n-2i)!}$ разделив n электронов на $2i$ спаренных и $n-2i$ не спаренных.

Примеры:

= 36 =

(1) 2 электрона с орбитальными функциями (состояние атома гелия $\psi = \psi_{100} \psi_{100}$):



$$\psi_{12} = \frac{1}{\sqrt{2}} \psi(\vec{r}_1) \psi(\vec{r}_2) (\uparrow_1 \downarrow_2 - \downarrow_1 \uparrow_2)$$

(2) 2 электрона с разными пространственными компонентами ψ_1 и ψ_2 :

Полный спин $S=0$: $\square \otimes \square$
простр. часть спин

$$\frac{1}{2} (\psi_1(\vec{r}_1) \psi_2(\vec{r}_2) + \psi_1(\vec{r}_2) \psi_2(\vec{r}_1)) (\uparrow_1 \downarrow_2 - \downarrow_1 \uparrow_2)$$

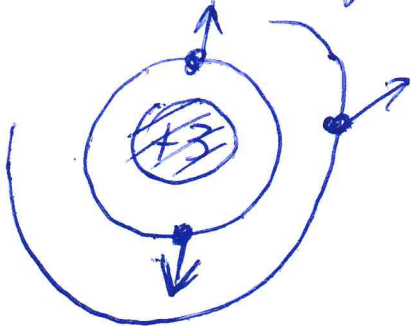
Полный спин $S=1$: $\square \otimes \square$
простр. часть спин

$$\frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_1(\vec{r}_1) \psi_2(\vec{r}_2) - \psi_1(\vec{r}_2) \psi_2(\vec{r}_1)) \begin{pmatrix} \uparrow_1 \uparrow_2 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} (\uparrow_1 \downarrow_2 + \downarrow_1 \uparrow_2) \\ \downarrow_1 \downarrow_2 \end{pmatrix}$$

3 проекции полного спина 1.

(3) Основное состояние Li . = 37 =

Три электрона, 2 имеют совпадающие пространственные компоненты, а третий - отличающуюся от них пространств. компоненту.



Обозначим две простоты

$$\psi_1 = \psi_2 = \psi$$

$$\psi_3 = \varphi.$$

Здесь не может быть полного спина

$$S_z = 3/2, \text{ т.к. } S = 3/2 \Leftrightarrow \begin{array}{|c|c|} \hline \square & \square \\ \hline \end{array} \Rightarrow \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \end{array},$$

спин простр. часть.

а у нас 2 из 3 совпадающие волновые ф-ции $\Rightarrow \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \end{array} \equiv 0$,
простр.

$$\text{Полный спин } S = 1/2 \rightarrow \begin{array}{|c|c|} \hline \square & \square \\ \hline \end{array} \Rightarrow \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \end{array}$$

спин простр. часть

$$\frac{1}{\sqrt{6}} \left(\psi(\vec{r}_1) \psi(\vec{r}_2) \varphi(\vec{r}_3) \cdot \left(\uparrow_1 \downarrow_2 - \downarrow_1 \uparrow_2 \right) \uparrow_3 - \right. \\ \left. - \psi(\vec{r}_1) \psi(\vec{r}_3) \varphi(\vec{r}_2) \cdot \left(\uparrow_1 \downarrow_3 - \downarrow_1 \uparrow_3 \right) \uparrow_2 + \right. \\ \left. + \psi(\vec{r}_2) \psi(\vec{r}_3) \varphi(\vec{r}_1) \cdot \left(\uparrow_2 \downarrow_3 - \downarrow_2 \uparrow_3 \right) \uparrow_1 \right) \quad (\star)$$

(Записано состояние с $S_z = +1/2 \uparrow$).

Для $S_3 = -\frac{1}{2}$ нужно обратить $= 38 =$
последнюю строчку. Три главных
в (A) - это антисимметризованное
разбиение 3х электронов на одну
пару и 1 не спаренный;

$$\{(12)3, (13)2, (23)1\}.$$

Если взять $\psi = \psi_{100}(\vec{r})$, а

$\varphi = \varphi_{200}(\vec{r})$ - другими словами приближе-
ние к основному состоянию атома
лития (в приближении бесконечности
электронов друг с другом).